

О ГЕЛИКОИДАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЕ В ФРУСТИРОВАННЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Р.С.Гехт, А.М.Епизин, В.И.Пономарев

Институт физики им.Л.В.Киренского СО РАН, Красноярск
(Поступило в Редакцию 8 ноября 1994 г.)

Хорошо известно, что эффекты фрустраций играют весьма важную роль в различных магнитных системах (см., например, [1]). Имеющиеся экспериментальные и теоретические исследования показывают, что они во многом проявляют свойства, принципиально отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается прежде всего в богатом разнообразии фаз, фазовых переходах и обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью систем к различного рода возмущающим взаимодействиям. Гексагональные [2] и объемно центрированные тетрагональные (ОЦТ) [3] антиферромагнетики являются типичным примером таких 3D-фрустрированных систем, проявляющих нетривиальное вырождение в основном состоянии при больших S . Квантовые флуктуации обычно снимают непрерывное (глобальное) вырождение. Однако при тонком балансе взаимодействий квантовые эффекты настолько важны, что могут решающим образом изменить и саму структуру основного состояния, и природу фазового перехода.

В данной работе мы исследуем влияние квантовых флуктуаций на волновой вектор геликоидальных структур в фрустрированных ОЦТ антиферромагнетиках (экспериментальные данные для таких соединений представлены в [4,5]). Рассматриваемая здесь задача описывается следующим гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = \sum_i \sum_n J_n \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\delta_n}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 — соответственно антиферромагнитные взаимодействия между ближайшими и следующими за ними (вдоль диагонали) спинами в плоскости квадратной решетки, J_3 — взаимодействие между ближайшими спинами в соседних (сдвинутых друг относительно друга) слоях.

В классике при $J_2 > 0$ могут реализоваться две различные геликоидальные структуры: одна при $J_2 < 0.5J_1$, другая при $J_2 > 0.5J_1$. Если $J_2 < 0.5J_1$ (но > 0), квантовые флуктуации дестабилизируют геликоидальную структуру, уменьшая тем самым область ее существования на классической фазовой диаграмме. Однако если $J_2 > 0.5J_1$, то оказывается возможной, наоборот, стабилизация геликоидальной структуры H квантовыми флуктуациями, а также существование вблизи границы вырождения (со стороны однородной фазы F на фазовой диаграмме) квантового геликоида. При этом непрерывный в классическом пределе фазовый переход $H-F$ сдвигается и становится переходом первого рода.

Действительно, при $J_2 > 0.5J_1$ спин-волновой спектр геликоидальной фазы с $\mathbf{Q} = (0, Q, 0)$ дается следующим образом:

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = 2J_1 S \left[(A_k \pm B_k^+)^2 - (C_k \pm B_k^-)^2 \right]^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь

$$\begin{aligned} A_k &= 2 \cos k_x + (1 + \cos Q)(\cos k_y + 2j_2 \cos k_x \cos k_y) - \\ &\quad - 2(1 + \cos Q + 2j_2 \cos Q + 4j_3 \cos Q/2), \\ B_k^{\pm} &= -4j_3(\cos Q/2 \pm 1) \cos k_x/2 \cos k_y/2 \cos k_z, \\ C_k &= (\cos Q - 1)(\cos k_y + 2j_2 \cos k_x \cos k_y), \end{aligned}$$

где $j_2 = J_2/J_1$, $j_3 = J_3/J_1$.

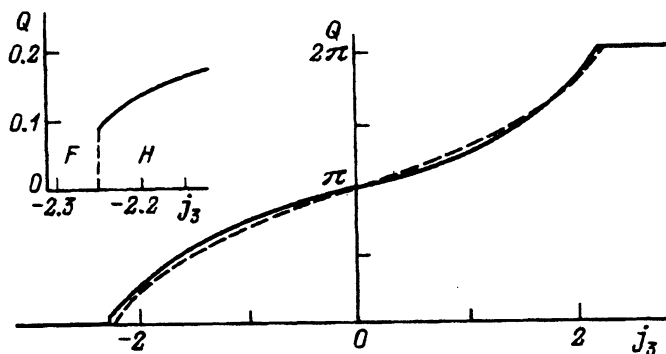
В пределе $S \rightarrow \infty$ волновой вектор геликоидальной фазы $Q = 2 \arccos(-j_3/(1 + 2j_2))$, а спектр (2) устойчив при всех значениях j_3 , меньших критического значения $|j_3| = 1 + 2j_2$. Вблизи линии перехода $1 + 2j_2 + j_3 = 0$ волновой вектор геликоида мал. Разложим в ряд нормированную энергию основного состояния с точностью до членов Q^6

$$e = e_0 + e_2 Q^2 + e_4 Q^4 + e_6 Q^6, \quad (3)$$

где коэффициенты разложения в первом порядке по $1/S$ даются в виде

$$\begin{aligned} e_2 &= -(1 + 2j_2 + j_3)/2! + a_2/S, \\ e_4 &= (1 + 2j_2 + j_3/4)/4! + a_4/S, \\ e_6 &= -(1 + 2j_2 + j_3/16)/6! + a_6/S, \\ a_n &= \frac{1}{J_1 S N} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial Q^n} \sum_{\pm} \sum_k \varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}, Q) \Big|_{Q=0}. \end{aligned}$$

В классике $e_4 > 0$, $e_6 < 0$. Однако, как показывают вычисления, вклад от квантовых эффектов во всех порядках $1/S$ противоположного знака. Так, например, в первом порядке по $1/S$ на самой линии $1 + 2j_2 + j_3 = 0$, $j_2 = 0.6$ для соответствующих коэффициентов имеем $a_4 = -0.0698$, $a_6 = 0.0686$.



Волновой вектор геликоидальной структуры при $j_2 = 0.6$ ($S = 1$). Сплошная линия — с учетом квантовых эффектов, штриховая — значения Q в классике, в увеличенном масштабе — зависимость Q от j_3 вблизи границы перехода $H-F$.

При изменении знака e_4 и e_6 минимум энергии достигается, если

$$Q = \left\{ -\frac{e_4}{3e_6} \left[1 + \left(1 - \frac{3e_2e_6}{e_4^2} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2}.$$

В результате на границе $1 + 2j_2 + j_3 = 0$ волновой вектор геликоида становится отличным от нуля. Более того, он отличен от нуля и в ферромагнитной области F на классической фазовой диаграмме, где с уменьшением j_3 плавное спадание Q заканчивается в отличие от непрерывного перехода скачком (см. рисунок).

Мы вычислили также квантовые поправки к волновому вектору геликоида при произвольных значениях j_3 . Состояние с минимальной энергией реализуется при значениях Q , удовлетворяющих уравнению

$$\cos Q/2 = -\frac{j_3}{1 + 2j_2} \left\{ 1 - \frac{1}{2(1 + 2j_2)S} [I_+(Q) + I_-(Q)] \right\},$$

где

$$I_{\pm}(Q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{A_k \pm B_k^+ - C_k \mp B_k^-}{\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k})} W_{\pm}(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k},$$

$$W_{\pm}(\mathbf{k}) = (1 + 2j_2 \cos k_x) \cos k_y \mp (1 + 2j_2) \cos(k_x/2) \cos(k_y/2) \cos k_z.$$

На рисунке дана зависимость Q от j_3 при $j_2 = 0.6$. Отметим, что вблизи другой границы ($1 + 2j_2 - j_3 = 0$) — границы геликоида и антиферромагнитной ($Q_z = \pi$) фаз — квантовые флуктуации, наоборот, разрушают модулированную структуру.

Список литературы

- [1] Gekht R.S., Ponomarev V.I. Phase Trans. **A20**, 1-2, 27 (1990); Гехт Р.С. УФН **159**, 2, 261 (1989).
- [2] Nikuni T., Shiba H. J. Phys. Soc. Jap. **62**, 9, 3268 (1993).
- [3] Rastelli E., Sedazzari S., Tassi A. J. Phys.: Cond. Matter. **1**, N 12, 4735 (1989).
- [4] Day P., Fyne P.J., Hellner E., Hutchings M.T., Münnighoff G., Tasset F. Proc. Roy. Soc. Lond. **A410**, 1, 135 (1990).
- [5] Bramwell S.T., Day P., Hutchings M.T., Thorne J.R.G., Visser D. Inorg. Chem. **30**, 2, 420 (1991).